Agilent 単結晶 X 線構造解析システム

高精度回折データ測定を容易な操作で実現

The Measure of Confidence

Agilent Technologies

高精度回折データ測定を実現します

アジレントの単結晶 X 線回折システムは、最高品質の回折データ測定を可能にします。旧 Oxford Diffraction社の 20 年以上にわたる主要コンポーネントの設計・製造の実績と専門知識に基づき、アジレントは、無機・有機分子を対象とした結晶構造解析や構造生物学向けの革新的なシステムを提供します。

Agilent Gemini システム

Agilent PX Scanner システム

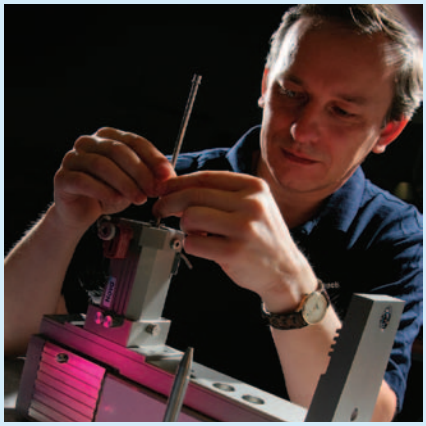
Agilent SuperNova システム

すべての主要技術を自社で開発・生産

Agilent X 線回折システムは、すべての主要コンポーネントが自社内で製造され、完全なユニットとして設計されています。単結晶回折像測定のために製造された精密部品、電子制御ユニット、X 線源、CCD 検出器、およびこれらを制御するソフトウェアにより、優れた回折像測定のための完全統合型ソリューションを提供いたします。

精密機器部品

X 線源



Web での X 線ユーザーコミュニティフォーラム

サンタクララ、カリフォルニアの X 線の研究拠点

X 線ユーザーコミュニティフォーラム

アジレントの専任研究者や世界中のユーザーと情報交換が可能です。

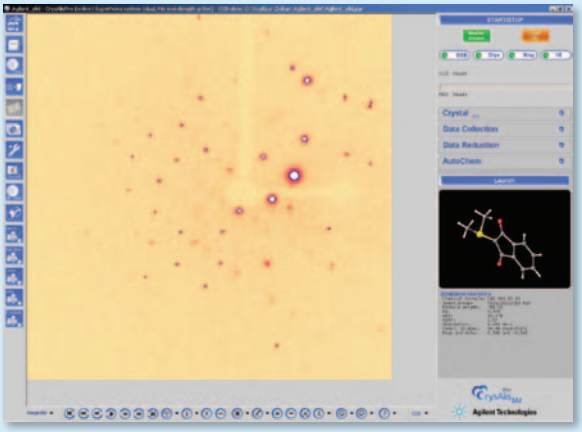
- 数多くの無機·有機分子結晶学者·ユーザー、構造生物学者との情報交換
- 新しいソフトウェアアップデートの情報を真っ先に入手可能
- 技術的な質疑応答、討論やディベートへの参加。大規模でアクティブなコミュニティならではの集合的な経験と専門知識を活用
- **www.agilentxrdforum.com** から、すべてのアジレントユーザーが参加可能

研究拠点

世界各地で展開するアジレントの X 線研究拠点を訪れ、データ収集が可能です。また、送付された試料による評価測定も対応可能です。

検出器

ソフトウェア



Agilent 単結晶 X 線構造解析システム

無機・有機分子結晶構造解析システム

アジレントは、デュアルソースシステムを世界で初めて実用化・上市いたしました。X 線源や検出器、キャビネットの組み合わせにより、幅広いアプリケーションや予算に応じた単結晶構造解析システムを提供しています。緻密なハードウェアと、ユーザーからの意見を取り入れつつ常に進化を続ける解析ソフトウェアを兼ね備えた Xcalibur、Gemini、SuperNova システムは、有機・無機分子の単結晶構造解析におけるアジレントの絶え間ない革新とリーダーシップを体現するものです。

外付け冷却装置を備えた
Gemini A Ultra システム一式

Xcalibur、Gemini

従来のシールドチューブシングルソースの Xcalibur システムとデュアルソースの Gemini システムは、もっとも経済的なアジレントの単結晶用回折計です。

特長

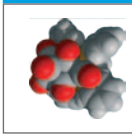
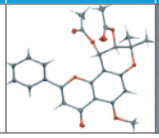
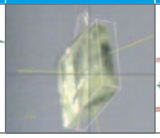
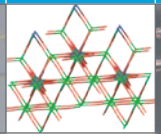
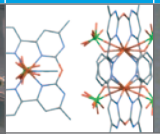
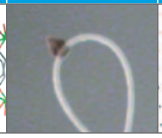
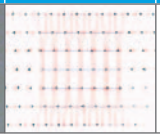
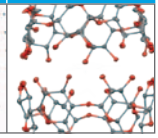
- シングルまたはデュアル (Gemini) ファインフォーカス改良 X 線源
- アジレントの高速 CCD 検出器は、最高の感度の EOS 検出器と広い検出エリアを有する Atlas を選択可能
- CrysAlis^{Pro} とオプションの AutoChem$^{2.0}$ — ユーザーからのフィードバックを元に進化を続けるソフトウェアにより、優れたデータ品質と自動化を実現

ファインフォーカス X 線源と
Eos CCD を備えた Xcalibur

Xcalibur と Gemini の利点

- データ品質を損なわずに手ごろな価格を実現
- Gemini — 幅広いアプリケーションに対応するデュアルソース構成 (Mo & Cu)
- X 線ビームサイズに柔軟に対応可能なコリメータ
- CrysAlis^{Pro} とオプションの AutoChem$^{2.0}$ による完全自動化
- E メールによるハードウェアとソフトウェアのアップデートレポート — どこにいても常にシステムの状態を把握
- 自動ワークフローまたは手動コントロール — 初心者にも熟練者にも対応

アプリケーション

受託分析	絶対構造決定	重原子サンプル	複雑な無機分析	高圧実験	ディスオーダー結晶	微小結晶	双晶	高分子
								

SuperNova

アジレントの第 3 世代のデュアルソースシステムである SuperNova は、最短の時間で高精度のデータを提供します。受託分析から絶対構造決定、高圧実験、また電子密度研究に至るまで対応する SuperNova は、無機・有機分子を対象とした X 線結晶構造解析を行う実験室に最適な多目的システムです。

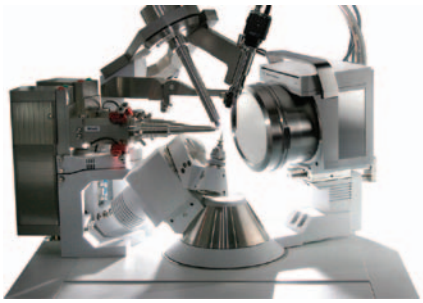
特長

- 低電力 (最大 50 W)、高輝度シングルまたはデュアルマイクロフォーカス X 線源、3 年保証を提供
- NEW — さらに進化を続ける、史上最高の明るさを誇る第 2 世代 Nova 線源
- アジレントの高速 CCD 検出器は、最高の感度の EOS 検出器と広い検出エリアを有する Atlas を選択可能
- CrysAlis^{Pro} とオプションの AutoChem$^{2.0}$ — ユーザーからのフィードバックを元に進化を続けるソフトウェアにより、優れたデータ品質と自動化を実現
- コンパクトな内蔵モジュール式システム

SuperNova の利点

- 明るい Cu 線源 (マイクロフォーカス Nova (Cu) 線源) と CrysAlis^{Pro} の優れた Cu データ処理機能の組み合わせ — ほとんどのデュアルソースシステムユーザーが、最適な波長として Cu を利用
- 短い時間で迅速かつ強力にデータを収集
- これまでは測定できなかったサンプルも測定可能に — Nova (Cu) 線源により、微小で非常に弱い回折斑点しか与えない結晶や、双晶でも優れたデータを取得
- AutoChem$^{2.0}$ (オプション) — 高速データ収集と自動構造解析により、生産性を向上
- コンパクトな設置面積と、優れた信頼性と保守性

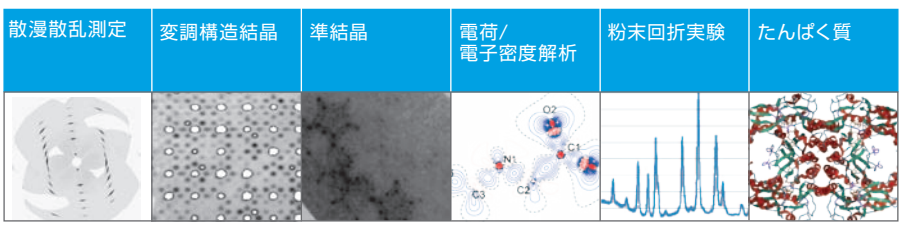
SuperNova本体、キーボードおよびモニター用テーブル



Atlas CCD を備えたデュアルソース SuperNova ゴニオメーター

ゴニオメーターとアップグレード

- 全てのアジレントの回折システムは、高精度 4 軸 κ ゴニオメーターを備えています。これにより、幅広いデータ範囲をカバーし、最適なデータ測定戦略を採用できます。
- すべてのシングルソース回折システムは、デュアルソースシステムにアップグレードできます。



Agilent 単結晶 X 線構造解析システム

構造生物学用システム

Agilent SuperNova と PX Scanner は、最先端の構造生物学ラボの多様なニーズに応えるユニークな機能と利点を備えています。結晶化スクリーニングから回折データ収集までに対応する、コンパクトでコスト効率の良いユーザーフレンドリーなシステムにより、シンクロトンビームラインを補完する理想的なラボソリューションを実現します。

SuperNova システム (大型キャビネット) とキーボードおよびモニター用テーブル

SuperNova

高品質なデータ、優れた信頼性、最大の稼働時間を実現するコンパクトなシールドチューブマイクロフォーカスシステムです。

特長

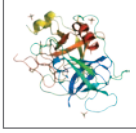
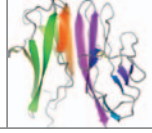
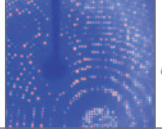
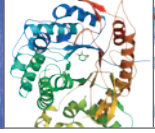
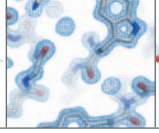
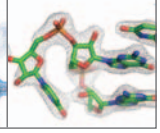
- NEW — 史上最高の明るさを誇る第 2 世代のマイクロフォーカス Nova X 線源、3 年保証を提供
- Eos、Atlas、または最大の検出エリアを有する Titan (165 mm) CCD 検出器
- CrysAlis^{Pro} PX — 高分子データの収集と処理に対応するユーザーフレンドリーな専用ソフトウェア

Nova X 線源と Titan CCD を搭載した SuperNova

SuperNova の利点

- シンクロトンビームラインを補完する理想的なラボソリューション
- 高速結晶スクリーニングまたは構造解析のためのデータ測定
- シールドチューブ X 線源 — 可動部品がなく、優れた信頼性と保守性を実現
- E メールによるハードウェアとソフトウェアのアップデートレポート— どこにいても常にシステムの状態を把握
- 低い維持費 — 消耗部品のメンテナンスはもとより、一般的なシステムと比較して電気・光熱水量を大幅に削減
- 全てを内蔵するコンパクトなシステム

SuperNova アプリケーション

分子置換法 (MR)		結晶スクリーニング	リガンド結合	SAD または重原子同型置換実験	RNA/DNA
					

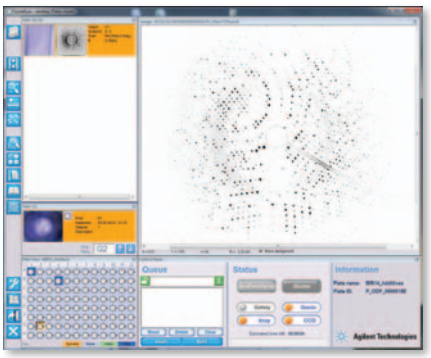
PX Scanner

マルチウェル結晶化プレート中のたんぱく質結晶を対象に、そのままの状態での光学、X 線スクリーニングを可能とするアジレント独自の装置です。光学および X 線回折イメージングを組み合わせた PX Scanner を使えば、母液中のたんぱく質結晶に触れることなく、視覚化、同定、X 線回折実験を行うことができます。

特長

- 垂直取り付け型の第 2 世代のマイクロフォーカス Nova X 線源
- 135 mm の検出エリアを備えた CCD 検出器
- タッチスクリーン式のコントロールパネルとプレート同定用のバーコードリーダー
- 結晶を最大 6° 傾斜させることにより、分解能 約 1.5 Å の測定まで対応
- ほぼすべての SBS フォーマットプレートに対応
- CrystalEyes — すべての光学および X 線回折スクリーニングに対応し、確実なデータ保存を可能にするユーザーフレンドリーなソフトウェア

PX Scanner システムとキーボードとモニター用のテーブル

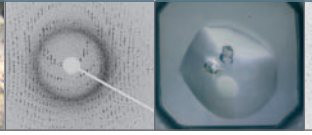
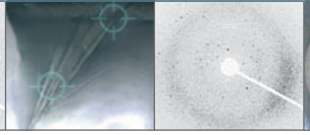


結晶化マルチウェルプレートを PX Scanner (上段) に挿入。光学 (中段) および X 線 (下段) スクリーニングに使用する CrystalEyes ソフトウェアプラットフォーム

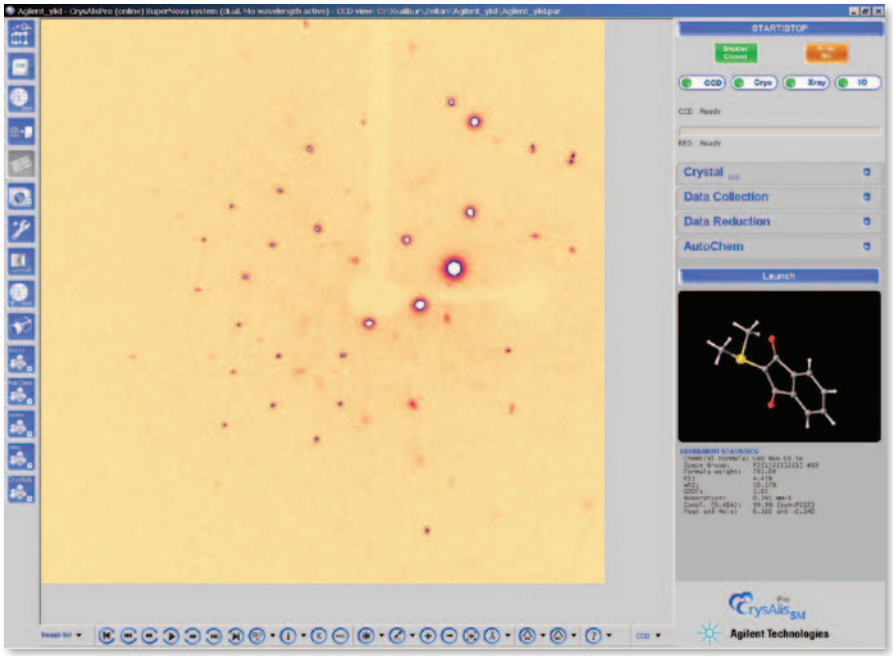
PX Scanner の利点

- 結晶性物質の初期同定
- 塩結晶とたんぱく質結晶の識別
- 最適な結晶成長条件の特定
- 分解能の比較など結晶の回折品質の比較
- 迅速に最終結果に到達するための自動結晶スクリーニング
- 小さすぎたり脆すぎたりしてマウントが困難な結晶の研究
- クライオプロテクタントの影響評価、最適条件の検討

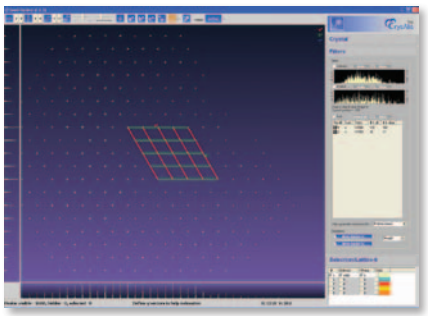
PX Scanner のアプリケーション

光学および in-situ X 線スクリーニング	分解能を始めとした結晶の回折品質の比較	微小で脆い結晶の分析	結晶化の困難な膜たんぱく質のスクリーニング
			

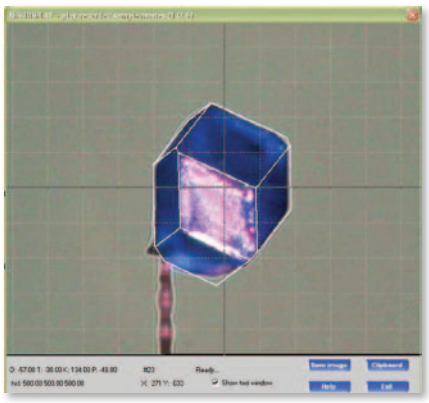
CRYSALIS^{PRO} — 優れたデータ品質を実現する ユーザー発想に基づくソフトウェア



CrysAlis^{Pro} SM — AutoChem 結果表示パネル



Ewald^{Pro} — 逆格子ビューアー



操作容易な結晶面指数づけツール

アジレントが提供する包括的データ収集·処理ソフトウェア CrysAlis^{Pro} は、ユーザーフレンドリーなインターフェースで無機·有機分子の測定および解析、たんぱく質の測定のいずれにも対応できるように設計されています。SM モード (無機 · 有機分子測定) と PX モード (たんぱく質結晶測定) のいずれかを選択するだけで、完全に最適化されたワークフローとデータ処理ルーチンが実現します。アップデートにより、すべてのユーザーに最新の開発技術を迅速に提供します。新しいバージョンにできるだけ多くのアイディアを取り入れるため、お客さまからのフィードバックを歓迎しています。

- 無料のマルチユーザー、マルチサイトライセンス
- 無料の定期アップデートでユーザー発想の新機能を提供

CrysAlis^{Pro} SM

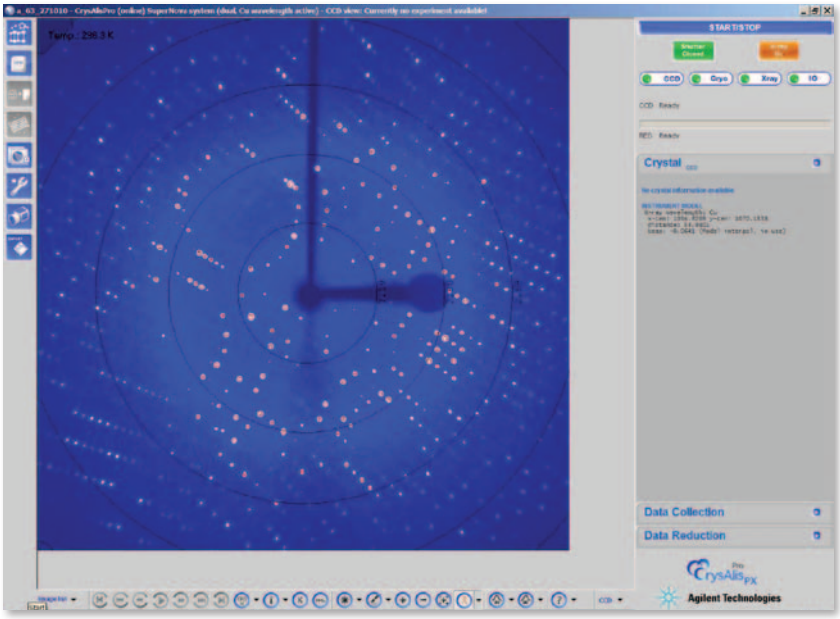
無機 · 有機分子試料に適した CrysAlis^{Pro} SMは、自動結晶スクリーニングに対応する、市場でもっとも高速かつインテリジェントな戦略ソフトウェアです。測定と同時に進行するデータ処理や、自動構造解析ソリューション、AutoChem (オプション) を用いた同時進行型構造解析 · 構造精密化等により、最短の時間で視覚的なデータを提供します。

- GUI またはコマンドラインコントロール
- 超高速予備実験による結晶品質の確認とデータ収集戦略の決定
- CellCheckCSD — CCDC との協力により開発。Cambridge 構造データベースの結晶格子情報に無料でアクセス可能
- 専門家の要求に対応する多数の解析ツール — 粉末回折、双晶の解析、不整合結晶、高圧実験用モジュール等のツール類
- シンクロトロンや他のフレームフォーマットで得られたデータの取り込みと処理が可能 (それぞれのフォーマットでの書き出しも可)

CrysAlis^{Pro} PX

高分子結晶スクリーニング、データ収集、データ処理に対応する CrysAlis^{Pro} PX は、シンプルなソフトウェアツールで構成されています。たんぱく質解析専用機能として以下の機能を有します。

- 単一のパッケージに統合されたデータ収集、データ処理、スケーリング機能
- 連続実験を迅速に行うための結晶スクリーニングツール
- 高分子結晶に最適化された戦略計算、データ処理、スケーリングアルゴリズム
- 高速マルチコアデータ処理
- イメージ解析 : d 値および分解能評価ツール
- シンクロトロン、イメージプレート、他の CCD のデータの取り込みとデータ処理
- MosFLM、XDS、HKL フォーマットでデータをエクスポート

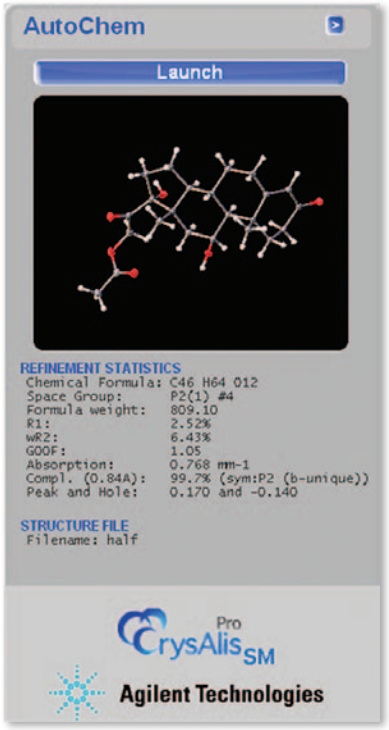


CrysAlis^{Pro} PX — たんぱく質用データ収集ソフトウェア

AutoChem$^{2.0}$

- 完全自動化構造解析、構造精密化、レポート作成機能、およびそれぞれの計算をデータ収集中にリアルタイムでフィードバック、表示
- 複数の構造解析プログラム* (直接法、パターソン法、電荷フリッピング法) を自動的に使用し、構造解析成功の可能性を最大化
- 統合構造解析環境の Olex2 を通じて、測定中に同時進行している構造解析プロセスに対して、いつでもユーザーによるインターラクティブな操作が可能
- AutoChem は、アジレントが提供するソリューションです。

*装置にインストールされているプログラムとライセンスの状況により異なります。



AutoChem メイン画面と構造解析および構造精密化設定パネル

コンパクトでモジュール化された統合型システム

Agilent Helijet 極低温冷却装置

モジュール化された
SuperNova ベースキャビネット内部

コンパクトなスタンドアロン型システム

- 設置場所を選ばないサイズ：SuperNova および PX Scanner システムの設置面積は 0.5 m^2
- 低電力高輝度微焦点 X 線源 – 空冷式ラジエーターユニットの組み合わせで、本体電源以外のユーティリティー不要
- 100 V コンセントからの電源のみで装置運転が可能

試料冷却装置

- Xcalibur、Gemini、SuperNova システムは、あらゆる市販の冷却および加熱装置に対応
- アジレントのオープンフロー液体ヘリウム冷却装置 Helijet (<15-75 K) のほか、Cryojet、Cryostream、Cobra、Desktop Cooler (DTC) にも対応
- 冷却装置をソフトウェアで完全にコントロール — CrysAlis^{Pro} のマルチ温度実験機能により、フレキシブルな測定が可能

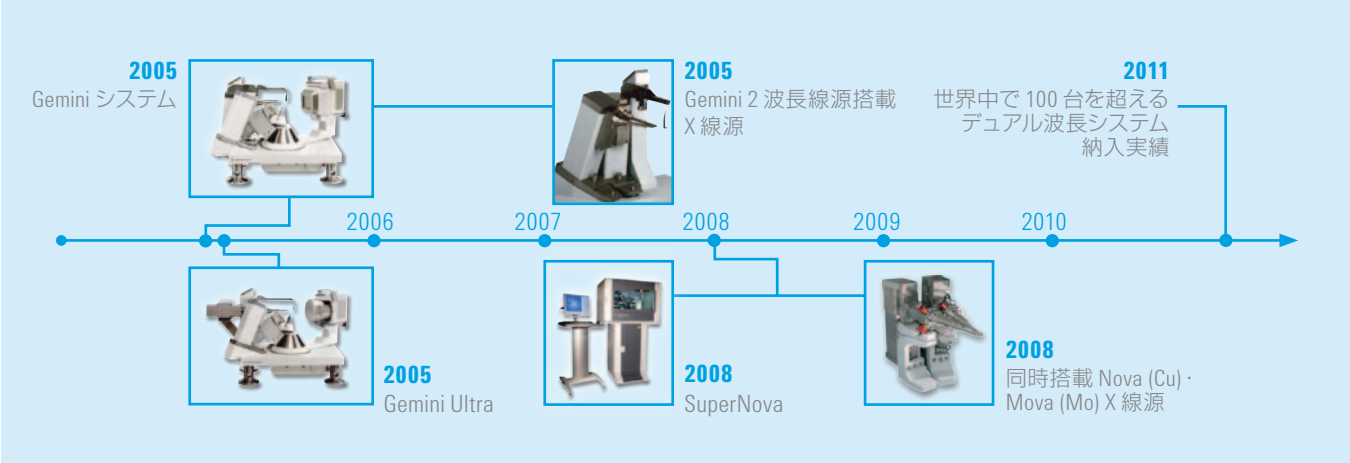
モジュール化されたユニット

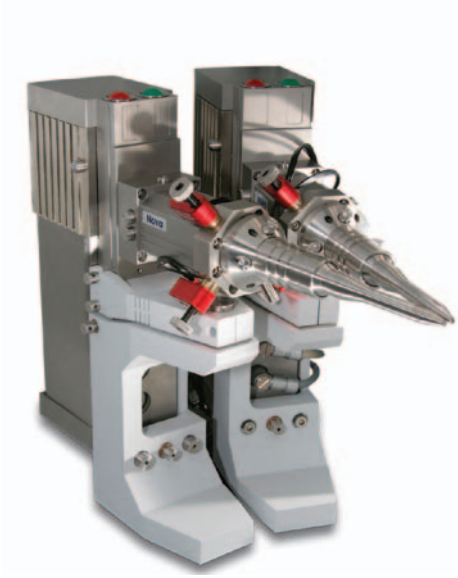
- 保守やサポートを容易にする各モジュールの設計
- 迅速で簡単な交換が可能なので、ダウンタイムが最小限に

SuperNova システム (空冷式ラジエーターユニット)

デュアルソース — 確かな実績

アジレント (旧 Oxford Diffraction) は、世界初のデュアルソース回折システム Gemini を 2005 年に上市しました。光学系とマイクロフォーカス線源の開発により、現在のデュアルソースシステムはこれまで以上に強力なものとなっており、現在もさらなる改良が続けられています。Gemini、Gemini Ultra、そして SuperNova と、アジレントはデュアルソース回折システムの設計と生産、その実績において常に世界をリードしています。





Nova および Mova デュアルマイクロフォーカス X 線源

ホームページ
www.agilent.com/chem/jp

アジレントカストマコンタクトセンタ
フリーダイヤル　**0120-477-111**

本書に記載の情報は予告なく変更されることがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社
© Agilent Technologies, Inc. 2012
Published in Japan, April 20, 2012
5991-0061JAJP

Agilent Technologies